

ОБ ИССЛЕДОВАНИИ ПРОЦЕССА
РЕЗОНАНСНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ
С ПОМОЩЬЮ СКАНИРУЮЩЕГО ТУННЕЛЬНОГО МИКРОСКОПА

М.Ю.Сумецкий

Найдена резонансная прозрачность трехмерного несимметричного потенциального барьера, моделирующего структуру "микровыступ – вакуум – дефект в пленке изолятора". При движении микровыступа параллельно поверхности пленки прозрачность над дефектом может иметь не только максимум, но и локальный минимум. Определена траектория острия сканирующего туннельного микроскопа в небольшой окрестности над дефектом.

В работах ¹ экспериментально изучено резонансное туннелирование электронов через небольшую совокупность точечных дефектов в пленке изолятора. В ² показано, что с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) ³ (недавно созданного в СССР) можно наблюдать одиночные дефекты и таким образом видеть внутреннюю структуру тонких пленок. Представляется, что эксперимент, аналогичный ², в котором имеется возможность варьировать не только приложенное напряжение и температуру, как в ¹, но и расстояние от острия до дефекта, позволяет рассмотреть процесс резонансного туннелирования в неосредненном, "чистом" виде. Сравнение результатов эксперимента с теорией дало бы возможность изучения обсуждавшихся в последнее время ⁵⁻⁷ как нестационарных эффектов, сопутствующих резонансному туннелированию, так и собственно динамики резонансного туннелирования. Ниже развита теория резонансного туннелирования электронов из острия СТМ через незаполненный уровень дефекта в пленке изолятора.

Гамильтониан, описывающий движение электронов, запишем в виде $H = -\nabla^2/2 + V(r) + \hat{u}(|r - r_0|)$. Здесь $V(r) = V(z, \rho)$ – осесимметричный потенциал, предполагаемый квазиклассическим вне границ пленки и острия, а \hat{u} – яма нулевого радиуса, моделирующая дефект. Ширину пленки считаем достаточно большой, обеспечивающей экспоненциально малую нерезонансную прозрачность. Тогда резонансный ток будет сосредоточен в узкой трубке, содержащей дефект, и достаточно быстро спадать при удалении микровыступа в сторону от точки (x_0, y_0, z_3) (рис. 1). В указанной трубке электроны движутся по траекториям $\rho(z)$, мало отклоняющимся от оси z . В первом приближении по ρ эти траектории удовлетворяют уравнению:

$$\rho_{zz} + \frac{p_z}{p} \rho_z + \frac{V_{\rho\rho}^0}{p^2} \rho = 0, \quad p(z) = \sqrt{2(E - V(z, 0))}, \quad V_{\rho\rho}^0(z) = \left. \frac{d^2 V}{d\rho^2} \right|_{\rho=0}. \quad (1)$$

Мы вычислим прозрачность барьера $D(E)$, считая смещение $s = \sqrt{x_0^2 + y_0^2}$ микровыступа в плоскости (x, y) много меньшим характерного расстояния задачи по оси z .

В малой окрестности дефекта, где $V(z, \rho)$ можно считать постоянным, волновая функция имеет вид ⁸:

$$\Psi(r) = \Psi_0(r) + \frac{\Psi_0(r_0) \exp(-p_0 |r - r_0|)}{(p_0 - \sqrt{2|E_0 - V(r_0)|}) |r - r_0|}, \quad p_0 = |p(0)|, \quad r_0 = (x_0, y_0, 0), \quad (2)$$

где Ψ_0 – волновая функция, соответствующая гамильтониану $H - \hat{u}$, а E_0 – энергия связного состояния в яме. Решение Ψ_0 определяется по схеме, изображенной на рис. 2. В области пленки потенциал V считаем зависящим лишь от z , так что уравнение Шредингера здесь допускает разделение переменных. Продолжая стоящую в (2) сферическую волну влево и требуя, после сшивки на границе z_1 , наличие лишь уходящей волны слева от z_1 , найдем волновую функцию $\Psi^{(1)}$. Продолжение сферической волны вправо осуществим, используя асимптотическое решение уравнения Шредингера в окрестности оси z , приведенное в ⁹, а также считая, что в малой окрестности вершины микровыступа граница имеет форму параболоида вращения $z - z_3 = \rho^2/2R$. Функции $\Psi_1^{(2)}$ и $\Psi_2^{(2)}$ получим требуя, чтобы, после последовательной сшивки сферической волны на границе пленки z_2 и на границе микровыступа, справа от z_3 решение имело вид уходящей волны. Далее, падающую под небольшим углом плоскую волну $\Psi_{\pi} = (2E)^{-1/4} \exp[i(p_x x + i p_y y - i(\sqrt{2E} - (p_x^2 + p_y^2)/\sqrt{2E})z)]$, $p_{x,y} \ll \sqrt{2E}$, вместе с соответствующей уходящей волной, продолжим через границу микровыступа, получив экспоненциально убывающее внутрь барьера решение $\Psi^{(0)}$. Найденная таким образом волновая функция, схематически изображенная на рис. 2, с точностью до экспоненциально малых слагаемых удовлетворяет граничным условиям рассматриваемой задачи, а из следующего из (2) уравнения $\Psi^{(0)}(r_0) + \Psi^{(1)}(r_0) + \Psi_1^{(2)}(r_0) + \Psi_2^{(2)}(r_0) = \Psi_0(r_0)$ определяется $\Psi_0(r_0)$.

¹⁾ При $z > z_3$, мы считаем $V(z, \rho) = 0$.

Теперь прозрачность, $D(E)$ получим, вычислив поток волновой функции слева от z_1 и осреднив его по p_x и p_y .

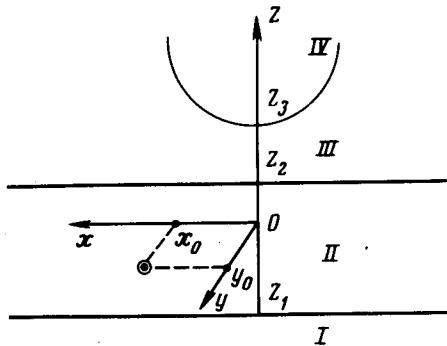


Рис. 1

Рис. 1. I – подложка, II – пленка изолятора, III – вакуум, IV – острье СТМ

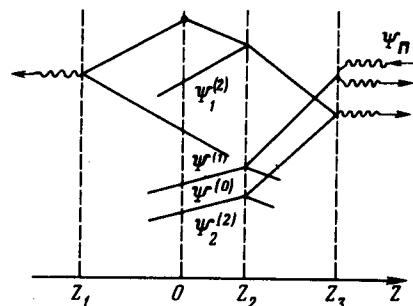


Рис. 2

Рис. 2. Схема построения волновой функции рассматриваемой задачи

Перед тем как выписать результат, определим решения $\rho_j^{1,2}$ уравнения (1) начальными условиями $\rho_j^1(z_j) = \rho_{jz}^2(z_j) = 0$, $\rho_j^1(z_j) = \rho_{jz}^2(z_j) = 1$, и введем матрицу $T = \|t_{ij}\|$ по формуле $\rho_3^k(z) = t_{1k}\rho_1^2(z) + t_{2k}\rho_2^2(z)$. Обозначим:

$$S_j = \int_0^{z_j} |p| dz, \quad \tau_j = \int_0^{z_j} \frac{dz}{|p|}, \quad p_j^\pm = \lim_{z \rightarrow z_j \pm 0} |p(z)|,$$

$$t_{0j} = R^{-1}t_{1j} + t_{2j}, \quad q_j = t_{j2} + \tau_2 p_2^\pm t_{j1}.$$

Тогда окончательное выражение для $D(E)$ примет вид

$$D(E) = \frac{2\pi^2 \Gamma_+ \Gamma_-}{(E - \tilde{E}_0)^2 + 1/4(\Gamma_+ + \Gamma_-)^2}, \quad (3)$$

где ширины распада Γ_+ и Γ_- определяются формулами

$$\Gamma_+ = \frac{8p_2^+ p_2^- p_3^+ (p_3^-)^2 e^{-2\delta_3} - as^2}{(p_2^+ + p_2^-)^2 [(p_3^+)^2 + (p_3^-)^2] q_0 q_1}, \quad \Gamma_- = \frac{2p_2^+ p_1^- e^{-2S_1}}{[(p_1^+)^2 + (p_1^-)^2] \tau_1}, \quad a = \frac{p_2^+ t_{01}}{q_0}. \quad (4)$$

Значение \tilde{E}_0 мы для краткости не приводим. Аналитическое выражение для T нетрудно получить, когда уравнение движения (1) в вакууме интегрируется в квадратурах, например, для независящего от ρ и сферически симметричного потенциала V . В простейшей модели однородного барьера, когда $p_0 = p_1^+ = p_2^+ = p_2^- = p_3^-$, имеем: $q_0 = R^{-1}z_3 + 1$, $q_1 = z_3$, $a = p_0(R + z_3)^{-1}$. В этом случае результат (3), (4) при $R = \infty$ следует из теории ¹⁰. Можно непосредственно показать, что прозрачность (3) не зависит от выбранного направления падающей волны. Об этом свидетельствует также симметрия формулы (3).

Если $\Gamma_+ < \Gamma_-$ при $s = 0$, то проницаемость барьера, как функция горизонтальных координат микровыступа, имеет максимум над дефектом в точке $s = 0$. В противоположном случае $\Gamma_+ > \Gamma_-$, когда микровыступ и дефект расположены достаточно близко к поверхности пленки, точка $s = 0$ соответствует локальному минимуму проницаемости (максимальной прозрачности теперь соответствуют положения вершины микровыступа на окружности $s = \text{const}$, определяемой равенством $\Gamma_+ = \Gamma_-$).

Острье СТМ с обычно используемой обратной связью, отслеживающее уровень постоянного тока $j = \int F(E)D(E)dE$ ($F(E)$ выражается через плотность состояний электронов и функцию распределения Ферми ¹¹) при движении из области удаленной от дефекта попадает над

дефектом в область, где $\Gamma_+ < \Gamma_-$. Часть области $\Gamma_+ > \Gamma_-$ может оказаться неустойчивой. Для достаточно малых Γ_+, Γ_- и смещения уровня \tilde{E}_0 функцию $F(E)$ можно вынести из-под знака интеграла и получить $j = \pi F(\tilde{E}_0) \Gamma_+ \Gamma_- (\Gamma_+ + \Gamma_-)^{-1}$. В этом случае условие постоянства тока имеет вид $\Gamma_+ = \text{const}$. Отсюда и из (4) получаем формулу, определяющую траекторию $z_3(s)$ вершины острия СТМ в небольшой области над дефектом, независящую от температуры и плотности состояний электронов:

$$z_3(s) = z_3(0) - s^2 / 2d, \quad d = a \frac{\partial S_3}{\partial z_3} \Bigg|_{s=0}, \quad (5)$$

где в S_3 надо учесть зависимость V от z_3 , обеспечивающую постоянное приложенное напряжение. Для модели однородного барьера радиус кривизны траектории (5) в вершине $d = R + z_3$. Полученные выражения нетрудно подправить с учетом различия эффективных масс в разных областях.

В заключение отметим, что метод фиксирования скачков электронов, заполняющих и освобождающих дефект ² (с понижением температуры скачки становятся значительно реже ¹²), а также метод неупругой тунNELьной спектроскопии для СТМ ¹³ в принципе позволяют обнаружить и частично исследовать дефект. Изучение процесса резонансного туннелирования дополняет указанные методы и дает возможность получить новую информацию о дефекте.

Автор искренне признателен Б.Л.Альтшулеру за полезное обсуждение результатов работы, Г.Н.Фурсею – за поддержку.

Литература

1. Koch R.H., Hartstein A. Phys. Rev. Lett., 1985, **54**, 1848.; Bending S.J., Beasley M.R. Phys. Rev. Lett., 1985, **55**, 324.
2. Welland M.E., Koch R.H. Appl. Phys. Lett., 1986, **48**, 724.
3. Binnig G., Rohrer H., Gerber Ch., Weibel E. Phys. Rev. Lett., 1982, **49**, 57.
4. Хайкин М.С., Трояновский А.М. Письма в ЖТФ, 1985, **11**, 1236.
5. Далидчик Ф.И. ЖЭТФ, 1984, **87**, 1384.
6. Ricco B., Azbel M.Ya. Phys. Rev., 1984, **29B**, 1970.
7. Stone A.D., Lee P.A. Phys. Rev. Lett., 1985, **54**, 1196.
8. Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: ЛГУ, 1975.
9. Сумецкий М.Ю. ЖТФ, 1984, **54**, 2227.
10. Либшиц И.М., Кирпиченков В.Я. ЖЭТФ, 1979, **77**, 989.
11. Туннельные явления в твердых телах. под ред. Бурштейна Э. и Лундквиста С., М.: Мир, 1973, с. 421.
12. Ralls K.S., Skocpol W.J., Jackel L.D. et al. Phys. Rev. Lett., 1984, **52**, 228.
13. Binnig G., Garcia N., Rohrer H. Phys. Rev., 1985, **32B**, 1336.

Поступила в редакцию

24 апреля 1986 г.

После переработки

11 августа 1986 г.